

# VU Research Portal

## Laser and synchrotron spectroscopic studies of molecular hydrogen

Dickenson, G.D.

2013

### **document version**

Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link to publication in VU Research Portal](#)

### **citation for published version (APA)**

Dickenson, G. D. (2013). *Laser and synchrotron spectroscopic studies of molecular hydrogen*. [PhD-Thesis - Research and graduation internal, Vrije Universiteit Amsterdam].

### **General rights**

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

### **Take down policy**

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

### **E-mail address:**

[vuresearchportal.ub@vu.nl](mailto:vuresearchportal.ub@vu.nl)

# Samenvatting

## Laser en synchrotron spectroscopie studies van moleculair waterstof

Dit proefschrift beschrijft een systematische experimentele studie van meerdere elektronische toestanden van het waterstofmolecuul met als doel het testen van een aantal huidige moleculaire theorieën. In de hoofdstukken 1- 3 wordt een studie van de grondtoestand  $X^1\Sigma_g^+$  gepresenteerd. Eén-foton overgangen tussen grondtoestand niveaus zijn uiterst zwak dus maken we gebruik van een indirecte methode: De  $EF^1\Sigma_g^+ - X^1\Sigma_g^+$  elektronische overgangen. Door het meten van overgangen en het nemen van combinatieverschillen tussen toestanden van dezelfde aangeslagen toestand, maar afkomstig van verschillende grondtoestanden, is het mogelijk om grondtoestand rotationele en vibrationele splitsingen te bepalen. Hoge rotatietoestanden in de elektronische grondtoestand worden bezet door de foto-chemische reactie van HBr. Dit dient om een niet-thermische grondtoestandistributie van “warme”  $H_2$  moleculen te produceren met rotatieniveaus tot  $J=19$ . Ook kan een ontladingsbron worden gebruikt, die efficiënt vibraties aanslaat in het molecuul. Vanwege zijn isolatie van de dichtstbijzijnde aangeslagen toestand, is de grond elektronische toestand relatief ongestoord, wat de mogelijkheid biedt om zeer nauwkeurige berekeningen te verrichten van de niveaustructuur. De uiterst nauwkeurige metingen in de hoofdstukken 1 en 3 testen de nieuwste grondtoestandberekeningen, QED en relativistische effecten inbegrepen, tot beter dan 30 MHz.

Voor verdere nauwkeurige metingen van grondtoestand niveaus de indirecte methode zoals hierboven beschreven, is een groter inzicht in de niveaustructuur van de  $EF^1\Sigma_g^+$  toestand vereist. Dit is het doel van hoofdstuk 2 waar een lage-resolutiestudie van de  $EF - X$  intervallen wordt uitgevoerd. Nogmaals, beginnend met een niet-thermische grondtoestand bezetting, werden meer dan 100 overgangen in het  $EF - X$  systeem gemeten. De zeer gestoorde opbouw van deze toestand wordt door de dubbele-put vorm van de Born-Oppenheimer potentiaal veroorzaakt. Hierdoor was het niet mogelijk om de identificatie van alle overgangen experimenteel te bevestigen en dus vertrouwen we op een voorspelling van de multi-channel quantum defect theorie (MQDT). Uit de experimentele resultaten blijkt dat de MQDT voorspellingen tot  $\sim 5 \text{ cm}^{-1}$  nauwkeurig zijn en constant zijn over een specifieke band. Dit is voldoende nauwkeurig om de gemeten overgangen te identificeren en verder een bijdrage te leveren aan de kennis van de niveau structuur van de  $EF^1\Sigma_g^+$  toestand. Dit

dient nu als een opstap naar hoge resolutie spectroscopie studies over rotationele en vibrationele niveaus in de  $X^1\Sigma_g^+$  grondtoestand.

De  $D^1\Pi_u$  toestand wordt behandeld in de hoofdstukken 4-6 voor de  $H_2$ , HD and  $D_2$  moleculen. Absorptie door de  $D^1\Pi_u$  toestand tonen kenmerkende Beutler-Fano profielen, als gevolg van predissociatie in de aangeslage toestand. Absorptiespectra werden gemeten met behulp van de unieke vacuum ultraviolet (VUV) Fourier transform spectrometer (FTS) die deel is van de DESIRS bundellijn van het synchrotron SOLEIL in Parijs. De vibrationele banden van de  $D^1\Pi_u$  bestrijken het volledige bereik van 110 000 - 135 000  $\text{cm}^{-1}$ . Daarom is breedband synchrotronstraling de ideale lichtbron om absorptiespectra te meten voor de analyse van deze toestand. Een model is ontwikkeld om accurate lijnvormparameters uit de FTS absorptiespectra te extraheren, die overeenkomen met de verzamelde gegevens uit conventionele experimentele technieken. De experimentele resultaten werden vergeleken met theorie en stemmen goed overeen.